一次元電子ガスのGreen関数法による取扱いにおける行列要素のパソコンによる導出

AUTHOR(S):

杉本, 勲; 青野, 茂行

CITATION:

杉本, 勲 ...[et al]. 一次元電子ガスのGreen関数法による取扱いにおける行列要素のパソコンによる導出. 物性研究 1987, 49(2): 225-242

ISSUE DATE:

1987-11-20

URL:

http://hdl.handle.net/2433/92867

物性研究 49－2（1987－11）

一次元電子ガスの Green 関数法による取扱い における行列要素のパソコンによる導出

金沢大・理　杉本　勲，青野茂行

（1987年8月10日受理）

1. はじめに

問題は一次元電子ガスに関するSólyomの Review [1] のセミナー中に生じた。例えば図1のAbrikosov diagram（略してDG）を計算するとする。結合定数は後方散乱 g_1 と前方散乱 g_2 にのみ限定するとし，それぞれのVertex（略してVTX），から生ずるスピン依存性を求めるとき，下の表現から出発するのが普通であろう。*1

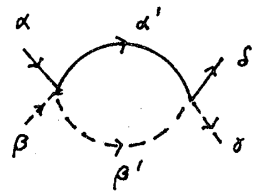


図　1

$$\sum_{\alpha'\beta'}\left(g_{1\parallel}\,\delta_{\alpha\beta'}\,\delta_{\beta\alpha'}\,\delta_{\alpha\beta'} + g_{1\perp}\,\delta_{\alpha\beta'}\,\delta_{\beta\alpha'}\,\delta_{\alpha-\beta'} - g_2\delta_{\alpha\alpha'}\,\delta_{\beta\beta'}\right)$$
$$\times\left(g_{1\parallel}\,\delta_{\alpha'\gamma}\delta_{\beta'\delta}\delta_{\alpha'\beta'} + g_{1\perp}\,\delta_{\alpha'\gamma}\delta_{\beta'\delta}\delta_{\alpha'-\beta'} - g_2\,\delta_{\alpha'\delta}\delta_{\beta'\delta}\right) \qquad (1,\ 1)^{*2}$$

然し上の1次の計算*3 でも $3^2=9$ 個の展開項について $\delta\,\delta\,\delta\cdots\cdots$ というKronecker delta 6次の計算を行わねばならない。2次の摂動では $3^3=27$ 個の項について $\delta\,\delta\cdots\,\delta$ の9次の計算を行わねばならない。2次のDGは6個あるから $27\times6=162$ 回ものスピン和を行う必要がある。然し162個のスピン和のうち大半はその過程で消えるのである。

Ting [2] は58個もの3次のDGの計算を行った。結果はかなり汚く疑わしい。くり込み固定点が g_1，$g_2\simeq\pi v_F$ のあたりに生ずるとのこと。$g_1^*-2g_2^*=\mathrm{const}$ の関係が成立たず，後でRezayi等[3]の再計算を必要とした。Tingとの違いは，Green関数の積分のところにあり，結合定数の部分は同じである。その結果，くり込み固定点はなくなり，$g_1^*-2g_2^*=\mathrm{const}$ が成り立っている。

＊1　記法は主として文献1に従う。

＊2　g_2 についてはスピン依存性は考えなくてよい。文献1，p 207

＊3　g については2次だが，vertex としては1次。

この論文で彼等は Green 関数の新しい積分法を提案している。余談だがふれておく。文献2では図2aのように，外線にエネルギー cut-off をいれる。その結果，

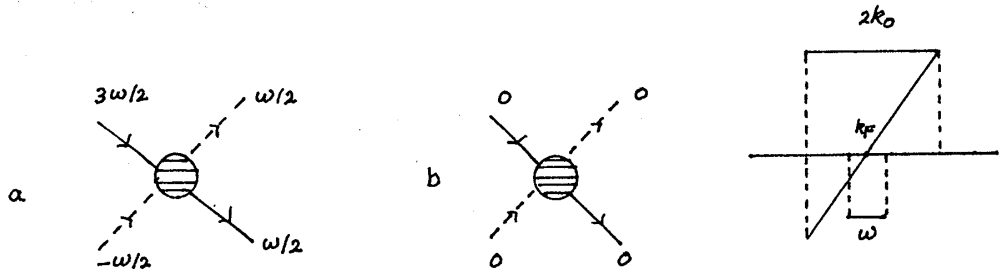


図　2

$$\int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi \mathrm{i}} GG = \log \frac{\omega}{\omega_0} - \frac{\pi \mathrm{i}}{2} \qquad (1,\ 2)$$

のように対数項の外に虚数部があらわれる。然し虚数部は Lie方程式をつくる段階で消えるか，消えると仮定する。文献3では外線のエネルギー cut-off はやめる（図2bの左）。このまゝでは積分は発散してしまうので，運動量の積分に際し Fermi 運動量の前後に $\pm\omega/2$ の cut-off をいれる。こうすることにより計算はかなり楽になり，上の虚数部も消える。

以上のような摂動計算は g_1 と g_2 を用いて3次まで行ったのが最高である。Ting も Rezayi もそれ以上のことを予告しているが未だに現れない。理由を想像するに，3次で g_3（Umklapp）を入れただけで DGの数は先の58から600に増え，文字通りやり切れないからであろう。以下に，総合定数の部分をパソコンで自動的に求める方法を紹介する。Green関数の積分に関する部分も計画中である。ω 積分は簡単であるが k 積分が容易でない。

Fに， Rezayi 等の計算にスピン依存性を入れた我々の拡張結果を示す。文献3のEqs.(41)と(42)の一般化である。

$$\frac{2 g_{1/\!/}}{2\xi} = \frac{1}{8} g_{1\perp}^2 \left(8 + 4 g_{1/\!/} + 2 g_{1\perp}^2 - g_{1/\!/}^2 \right)$$

$$\frac{2 g_{1\perp}}{2\xi} = \frac{1}{8} g_{1\perp} \left(8 g_{1/\!/} + 2 g_{1\perp}^2 + 2 g_{1/\!/}^2 + g_{1/\!/}^2 \right) \qquad (1,\ 3)$$

$$\frac{2 g_2}{2\xi} = \frac{1}{16} g_{1\perp}^2 \left(8 + 4 g_{1/\!/} + 2 g_{1\perp}^2 - g_{1/\!/}^2 \right)$$

上から直ちに

$$\frac{\partial}{\partial \zeta}(\, g_{1/\!/} - 2\, g_2 \,) = 0, \quad g_{1/\!/}^{*} - 2\, g_2^{*} = g_{1/\!/} - 2\, g_2 \qquad (1,\ 4)$$

2. 基礎的考察

今考えているモデルでは，ＶＴＸ関数は一般に

$$\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta} = \Gamma_{1/\!/}\, \delta_{\alpha\gamma}\, \delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha\beta} + \Gamma_{1\perp}\, \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha -\beta} + \Gamma_2 \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \qquad (2,\ 1)$$

$\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}$に対しては，$\Gamma_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}$，$\Gamma_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}$，$\Gamma_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}$ が許される。これと上を結びつけると，

$$\Gamma_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = \Gamma_{1/\!/} + \Gamma_2, \quad \Gamma_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow} = \Gamma_2, \quad \Gamma_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} = \Gamma_{1\perp} \qquad (2,\ 2)$$

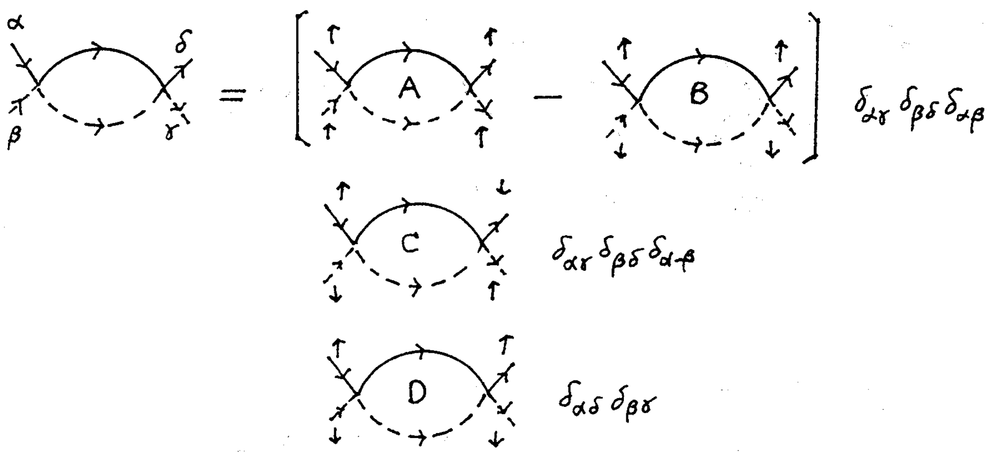
従って（２，１）を書き換えて，

$$\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta} = (\, \Gamma_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} - \Gamma_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow} \,)\, \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha\beta}$$

$$+ \Gamma_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}\, \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha -\beta} + \Gamma_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}\, \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \qquad (2,\ 3)$$

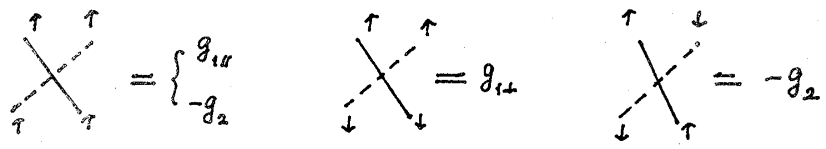
この関係はＤＧ中にあらわれるどのＶＴＸに対しても成立つ。

図１について詳しく調べてみると，



（２，４）

上のＡ～Ｄについて考察する。そのために裸のＶＴＸから何が生ずるかをまとめておく。

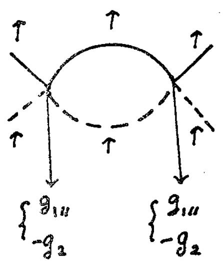


（２，５）

g_2の負号は，ハミルトニアン，$g_1a^+b^+ab + g_2a^+b^+ba = (g_1 - g_2)\,a^+b^+ab$ から生ずる（a，bはkが＋，－の分枝に対応）

さて，Ａの場合スピンの保存から下の場合だけが生じ，各ＶＴＸはそれぞれに示したcoupling constの寄与を示す。

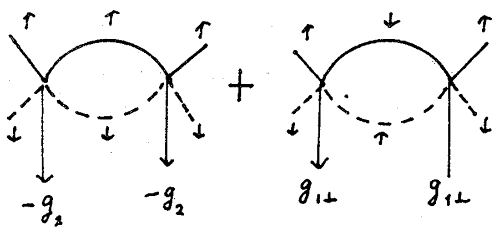
Ａ



$$= g_{1\parallel}^2 + g_2^2 - 2g_{1\parallel}g_2 \qquad (2,\ 6A)$$

同様にして

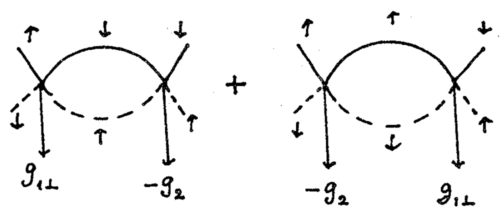
Ｂ



$$= g_2^2 + g_{1\perp}^2$$

（２，６Ｂ）

Ｃ

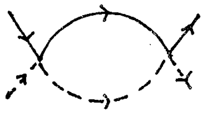


$$= -2g_{1\perp}g_2$$

（２，６Ｃ）

$$D = B = g_2^2 + g_{1\perp}^2 \qquad (2,\ 6D)$$

従って全体の寄与は



$$
\begin{aligned}
&= (g_{1\parallel}^2 - g_{1\perp}^2 - 2g_{1\parallel}g_2)\,\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}\delta_{\alpha\beta} \\
&\quad -2g_{1\perp}g_2\,\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}\delta_{\alpha-\beta} \\
&\quad +(g_{1\perp}^2 + g_2^2)\,\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}
\end{aligned}
\qquad (2,\ 7)
$$

以上のことを計算機風に語れば，A～D何れにせよ，外線のスピンをIMPUTし，各VTXでスピンの保存を考えると，そのVTXが生む g_i の組合せが決まる。こういう仕事は計算機が得意である。Ting の仕事のうちcoupling constを見つける段階がパソコンで1時間半ほどで終ったのである。

3. プログラムの説明，使用法

PROGRAM Third は Tingの計算の再現を行う。BASICで書かれている，Tingの論文で5aと命名してある図3を例にして説明をする。

DGのトポロジーを数値化しDATAとする。

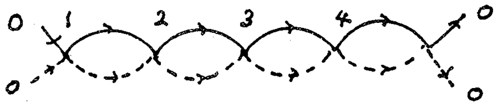


図3　Ting の5aダイヤグラム

$\left.\begin{array}{l}\text{—>—：1,-->--：－1で表し，}\\ \text{VTX×に1～4と番号づけ，}\\ \text{外線の始点，終点に0をつける。}\end{array}\right\}$ （3，1）

プログラムの STATEMENT NO. 2860～2960に DATAとして打ちこんである。これを表1に再掲する。2860はタイトル。2870は点線が外部に始まりVTX0に終ることを示す。2880は点線がVTX1に始まりVTX2に終ることを示す。以下この要領である。

プログラムの流れ図を下に示す。

初期化 → 計　算 → 文字変換（CONVERT） → 印　字

各々については後で詳述するから，ここでは予備知識にとどめる。

初期化：DATAの読み込み。

計算：§2で述べた計算を行う。

文字変換：最終結果は数式（文字列）となってOUTPUTされる。ところで計算は整数の演算に終始しているのであるから，その結果を文字に変換することがこの部分で行われる。詳細はそのSUBROUTINEの説明のところで行う。数式処理ということでLISPやREDUCEをつかえば非常に多くの時間と金が必要であろう。

以下にプログラムを順に追って説明する。断りなしに使う数字はSTATEMENT　NUMBERである。

表1　Tingの5aのDATA

2860	DATA	5A		
2870	DATA	−1,	0,	1
2880	DATA	−1,	1,	2
2890	DATA	−1,	2,	3
2900	DATA	−1,	3,	4
2910	DATA	−1,	4,	0
2920	DATA	1,	0,	1
2930	DATA	1,	1,	2
2940	DATA	1,	2,	3
2950	DATA	1,	3,	4
2960	DATA	1,	4,	0

Ⅰ．初期化

30 CLEAR,, 1000 ；FOR NEXTの深いレベルで走らせる時に必要な命令。

40 DEFSTR　A : DEFINT B-Z　；先頭にAのつく変数（AA，A5など）は文字変数，先頭にB～Zがつく変数は整数。

50 DIM L(10, 4), V(4, 8), ……；記憶場所の確保。それぞれについては順を追って説明する。

80 READ AD ；DATA のタイトル5A（2860にある）がADに保存される。

90～110 ；DATA の読み込み。10本のラインのそれぞれがもつ3つの情報が一時X(I, J)に貯えられる。X(I, 1)（I＝1～10）にはラインが点線（−1）か実線（1），X(I, 3)には始点，X(I, 4)には終点の情報が入る。X(I, 2)は空。

150～200；ささやかなチェックルーチン。X(I, 3)とX(I, 4) のそれぞれのIについての和は20になる。NOなら〝DATA ERROR〟をPRINTしてSTOP。

250～330；X(I, J)に貯えた情報をラインに配る。6本の内線はL(1, J)～L(6, J)に，外線のうち-->--はL(7, J)とL(8, J)に，—>— はL(9, J)とL(10, J)に。

L(I, 1)；1ならI番目のラインは実線，−1なら点線。

L(I, 2)；I番目のラインのスピン状態。1なら↑，−1なら↓。

L(I, 3)；ラインの始点のVTXの番号。0なら外部。

L(I, 4)；ラインの終点のVTXの番号。0なら外部。

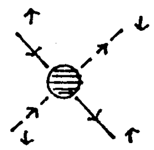
Ⅱ．計算　SUBROUTINE ＊ MAIN

まず外部スピンの状態を指定する。これらは（2, 4）でA，B，Cで与えてあるが，プログラム内ではそれぞれが，3，1，2となっている。

1の場合。すなわち右図

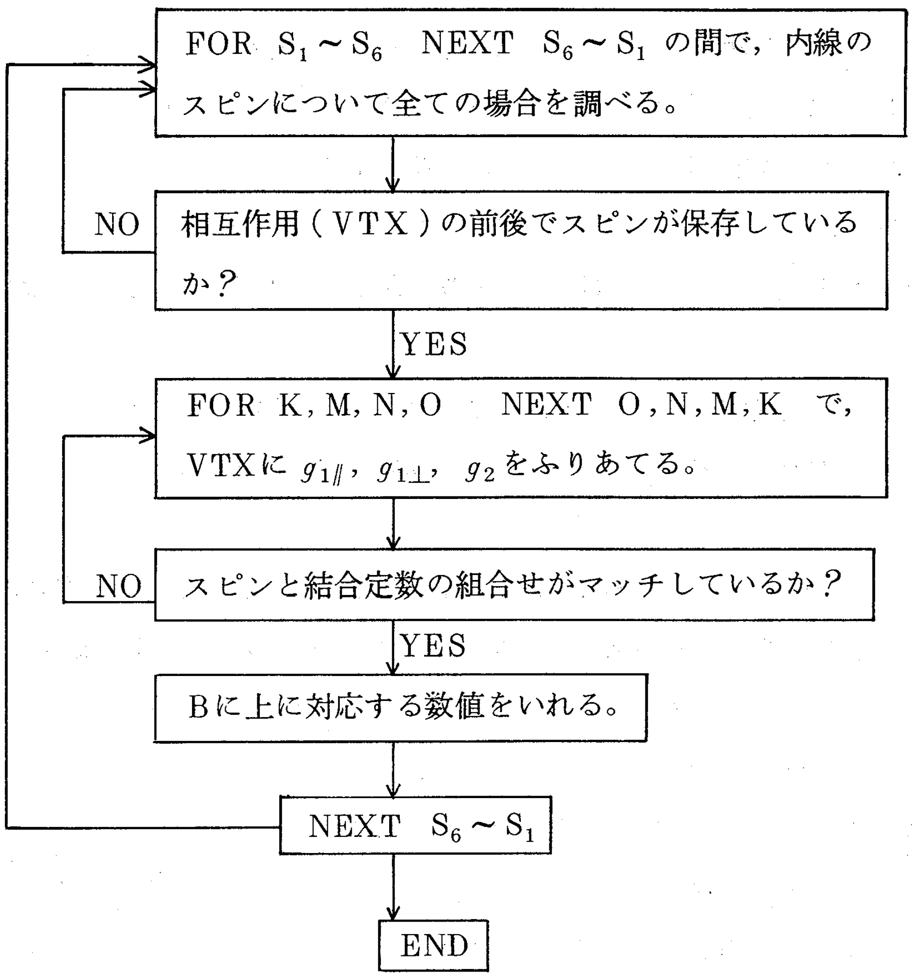
```
370  L(7, 2)=-1 : L(8, 2)=-1 : L(9, 2)=1 : L(10, 2)=1
390  GOSUB * MAIN :
```

これで SUBROUTIN＊MAIN に飛んで計算する。



以下で＊MAIN の説明をする。FORTRUN で SUBROUTINE へ飛ぶときは，引き数で変数をつれてゆき，SUBROUTINE で必要な変数を定義するが，BASIC ではこれができず，MAINROUTINE と SUBROUTINE で変数を共有する。初心者にはこの方が解りよいかもしれない。

1010～2170で行われていることの流れ図をまづ示す。



1150～1170　ＶＴＸの内味Ｖ（Ｉ，Ｊ）を空にする。

1210　Ｌ（1，２）＝Ｓ１～Ｌ（6，２）＝Ｓ６；内線のスピンにＳ１～Ｓ６を与える。

1250　FOR　Ｋ＝７　TO　10～1340；外線の情報をそれに連るＶＴＸに与える。

1380　FOR　Ｋ＝１　TO　６～1460；内線の情報をそれに連るＶＴＸに与える。

ＶＴＸには４本のラインが出入する。それぞれは点線か実線か，スピンが↑か↓であるから，ＶＴＸには８通りの情報が集ることがある。それらは下の様に仕分けされる。ＩをＶＴＸの番号として（Ｉ＝１～４），

Ｖ（Ｉ，１）；入射線が実線（１）か，点線（－１）か。

Ｖ（Ｉ，２）；入射線のスピンが↑（１）か，↓（－１）か。

Ｖ（Ｉ，３）；２本目の入射線が実線（１）か，点線（－１）か。

Ｖ（Ｉ，４）；２本目の入射線のスピンが↑（１）か，↓（－１）か。

Ｖ（Ｉ，５）～Ｖ（Ｉ，８）；上で入射線 → 放出線。

ラインの情報がＶＴＸに渡されると，これからはＶＴＸのみを考えればよいことになる。

1500～1540；すべてのＶＴＸ（Ｊ＝１～４）でスピンが保存しているかどうかを調べる。即ち，２つの射線のスピンの和，Ｖ（Ｊ，２）＋Ｖ（Ｊ，４）が放出線のスピンの和，Ｖ（Ｊ，６）＋Ｖ（Ｊ，８）に等しいかどうかを確かめる。NOなら2160へ行き，NEXT　Ｓ６～Ｓ１。

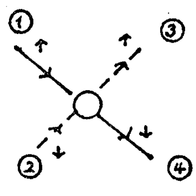
1630～2140；すべてのVTXに $g_{1/\!/}$，$g_{1\perp}$，g_2 を割りあてる。

FOR　Ｋ＝１　TO　３～FOR　Ｏ＝１　TO　３の仕事：それぞれのＶＴＸ（１～４）に対し，Ｋ～Ｏの値が１のときは $g_{1/\!/}$，２のときは g_2，３のときは $g_{1\perp}$ とする。こうした理由はあとで明らかになる。

1700；ＶＴＸのスピン状態が∥か⊥かを調べる。即ち，一番目のＶＴＸでＶ（1，２）＋Ｖ（1，４）＝０なら２本の入射線のスピンは⊥，その時は1770へ行く。≠０なら∥だから次の文1710へ行く。

1710；スピンは∥。従って $g_{1/\!/}$ と g_2 がOK。$g_{1\perp}$ はNO。$g_{1\perp}$ はＫ＝３を意味するから次の組合せを調べる（GO　NEXT　Ｏ～Ｋ）。結果的に，Ｋ＝１（$g_{1/\!/}$ を意味する），Ｋ＝２（g_2）が割りあてられ，次のＶＴＸのチェックへ行く（GO　1840）。

1770；スピンが⊥の時はここへ来る。Ｗ７＝Ｖ（1，１）＊Ｖ（1，２）＊Ｖ（1，５）＊Ｖ（1，６）とおき，この値を求める。Ｗ７＜０の時は $g_{1\perp}$，Ｗ７＞０の時は $g_{2\perp}$（$=g_2$）である。なぜなら，右図で入射線と放出線に①と③をとると，Ｖ（1，１）＝1，Ｖ（1，２）＝1，Ｖ（1，５）＝－1，



V(1, 6)=1でW7<0。①と④をとると同じようにしてW7>0。W<0，K=3なら $g_{1\perp}$がOK，W7>0，K=2なら g_2 がOKである。そして次のVTXのチェックに向う。上の何れもNOならGO NEXT O～K。

1840～2060；同じことをVTX 2～4で行う。結果はBに貯える。ただし(2, 5)の下で注意した g_2 の負号が陽にあらわれるようにするため，g_2 が寄数回生ずるときは(−1)が生ずるように，

$$B(K, M, N, O) = \{(-1)^{\Delta}(K+1)\} * \{(-1)^{\Delta}(M+1)\} \cdots\cdots$$

としてある。K～O=2のとき g_2 があらわれるのだから，それぞれに対して$(-1)^{(2+1)}$となり，−1の因子が保証される。

これで外部スピン状態1(式(2, 4)のC)の場合の吟味が終ったので400に帰る。

400 GOSUB* BT；Bに貯えてある結果をSUBROUTINE* BT(2610～2650)を使ってTに移す。

次に外部スピン状態2(式(2, 4)のB)の計算を行う。このスピン状態は，Cのスピン状態の右側をひっくり返して得られる(440～470)。そして510～530でBを空にし，再び*MAINに行き(550)，Bに出た結果を

560 GO SUB* BUでUに移す。

同様な計算がスピン状態3(式(2, 4)のA)に対して行われ，結果はBにそのまゝ残しておく。

さて，(2, 4)を見て $\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}\delta_{\alpha\beta}$ の係数はB−T(=G)だからGに貯える(720～740)。

Ⅲ. 文字変換，SUBROUTINE*CONVERT

初めに仕事の大略を示す。*CONVERTのIMPUTはSで，OUTPUTはAAである。

先づT(スピン状態C)をSに移し(760)，Sの内容を文字列に変換してAAにOUTPUTし，これをABに貯える(780)。

AAを空にし(790)，同様なことをUに対して行い，ACに貯える(830)。

さらにGが文字列に変換され(860, 870)，AEに貯えられる。

最後に結果が印刷されて(920～980)，プログラムが終る。

SUBROUTINE*CONVERの説明

まづ行列Bの要素と文字列との対応を説明する。簡単な例として g に関して2次の場合を考える。その時はBは3×3行列でよい：

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{ccc} g_{1\parallel} & g_{1\perp} & g_2 \end{array} \\
B= & \left[\begin{array}{ccc} & & \\ & & \\ & & \end{array}\right] \begin{array}{c} g_{1\parallel} \\ g_{1\perp} \\ g_2 \end{array}
\end{array}
$$

そしてその要素を係数と見なす。例えば

$$
\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = g_{1\parallel}\ g_{1\perp} - g_{1\perp}\ g_2, \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = g_{1\parallel}^2
$$

ところで

$$
(A)\ \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = g_{1\parallel}\ g_{1\perp} + g_{1\perp}\ g_{1\parallel} = 2\, g_{1\parallel}\ g_{1\perp}
$$

は次のようにも書ける。

$$
(B)\ \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \text{ or } \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
$$

(A)より(B)の方が望ましい。

＊CONVERでは上のような行列がSとして IMPUT されている。そこで

S（1, 2）＝S（1, 2）＋S（2, 1）, S（2, 1）＝0

としなければならない。S（1, 2）とS（2, 1）が同じ g（の積）を与えるかどうかを判断するために，$g_{1\parallel}$, $g_{1\perp}$, g_2 に３，５，７の素数を対応させる。プログラムの内では，WW(1)＝３，WW(2)＝５，WW(3)＝７とする。そしてW＝WW(I)＊WW(J)と同じ値をもつものが別の組合せ，W２＝WW(K)＊WW(L)にあるかどうかを探すのである。以上のことが，g の４次の場合に2250～2420で行われている。

後段の文字列への変換は簡単である。A(1)＝〝$g_{1\parallel}$〃，A(2)＝〝g_2〃，A(3)＝〝$g_{1\perp}$〃，A＝〝＊〃として，すべての行列要素を文字列へ移す。2460～2580がこれである。

Ⅳ. 終りに

我々はこのプログラムをつかってTingの結果を再現した。Tingの58個のDGはそのタイトル(文献2の p. 4036)を使って表1の如く全部うちこんである。そしてRUNさせると1，2分後に結果が出はじめ，約1時間半で全部が終る。いうまでもなく $g_{1\parallel}$ と $g_{1\perp}$ が区別されている。これにRezayi等の得たGreen関数を用いてLie方程式をつくるとIに与えた結果になる。

我々のプログラムにはまだいくつかの工夫がしてあるが，本質的でないのでそれらには触れない。更に高次のDGを得るのは，このプログラムの詳細を理解したものにとっては容易であろう。

文　献

1) J. Sólyom: Adv. Phys. **26** (1979) 201.

2) C. S. Ting: Phys. Rev. B **13** (1976) 4029.

3) E. H. Rezayi, J. Sak and S. Talukdar: Phys. Rev. B **19** (1979) 4757.

追記　上で使った〝我々〞という語は正確でない。この報告は，杉本の修士論文とそれに伴うプログラムならびに解説書を青野が再編したものである。従って文責は青野にある。もしプログラムのコピーを望む方があればフロッピーを御送りする。

なお，すべての過程で木村実教授の有益な助言を得た。心から感謝をする。

"THIRD"

```
10 'ｼｮｷ ｾｯﾃｲ
20 '
30 CLEAR ,,1000
40 DEFSTR A:DEFINT B-Z:'ｾﾝﾄｳﾆ Aﾉ ﾂｸﾍﾝｽｳ ﾊ ｽﾍﾞﾃ ﾓｼﾞﾚﾂ ｿﾉﾀﾊ ｽﾍﾞﾃ ｾｲｽｳ
50 DIM L(10,4),V(4,8),B(3,3,3,3),S(3,3,3,3),T(3,3,3,3),U(3,3,3,3),WW(3),X(10,4)
60 DIM G(3,3,3,3)
70 '
80 READ AD:'ﾀｲﾄﾙ ﾖﾐｺﾐ
90 FOR I=1 TO 10
100 READ X(I,1),X(I,3),X(I,4):'line data ﾖﾐｺﾐ  X(I,2) ﾊ dummy
110 NEXT I
120 '
130 'line data check
140 '
150 Y3=0:Y4=0
160 FOR I=1 TO 10
170 Y3=Y3+X(I,3):Y4=Y4+X(I,4)
180 NEXT I
190 IF Y3<>20 OR Y4<>20 THEN 200 ELSE 250
200 PRINT "DATA ERROR":STOP
210 '
220 'external line ﾄ internal line ﾉ ﾅﾗﾋﾞｶｴ
230 'external line ﾊ L(7,*)-L(10,*) internal line ﾊ L(1,*)-L(6,*)
240 '
250 J=6:K=8:M=0
260 FOR I=1 TO 10
270 D=X(I,3)*X(I,4)
280 IF D=0 AND X(I,1)<0 THEN J=J+1 ELSE 300
290 L(J,1)=X(I,1):L(J,3)=X(I,3):L(J,4)=X(I,4):GOTO 330
300 IF D=0 AND X(I,1)>0 THEN K=K+1 ELSE 320
310 L(K,1)=X(I,1):L(K,3)=X(I,3):L(K,4)=X(I,4):GOTO 330
320 M=M+1:L(M,1)=X(I,1):L(M,3)=X(I,3):L(M,4)=X(I,4)
330 NEXT I
340 '
350 'external spin set 1
360 '
370 L(7,2)=-1:L(8,2)=-1:L(9,2)=1:L(10,2)=1
380 '
390 GOSUB *MAIN :'input L(1,*)-L(10,*) output B(3,3,3,3)
400 GOSUB *BT:':ｹｯｶ ｦ T ﾆ ﾎｿﾞﾝ
410 '
420 'external spin set 2
430 '
440 IF L(7,3)=0 AND L(9,3)=0 THEN SWAP L(7,2),L(9,2)
450 IF L(7,3)=0 AND L(10,3)=0 THEN SWAP L(7,2),L(10,2)
460 IF L(8,3)=0 AND L(9,3)=0 THEN SWAP L(8,2),L(9,2)
```

```
470 IF L(8,3)=0 AND L(10,3)=0 THEN SWAP L(8,2),L(10,2)
480 '
490 ' B=0
500 '
510 FOR I=1 TO 3:FOR J=1 TO 3:FOR K=1 TO 3:FOR M=1 TO 3
520 B(I,J,K,M)=0
530 NEXT M,K,J,I
540 '
550 GOSUB *MAIN
560 GOSUB *BU:'ｹｯｶ ｦ U ﾆ ﾎｿﾞﾝ
570 '
580 ' B=0
590 '
600 FOR I=1 TO 3:FOR J=1 TO 3:FOR K=1 TO 3:FOR M=1 TO 3
610 B(I,J,K,M)=0
620 NEXT M,K,J,I
630 '
640 'external spin set 3
650 '
660 L(7,2)=1:L(8,2)=1:L(9,2)=1:L(10,2)=1
670 '
680 GOSUB *MAIN
690 '
700 'B-T ﾉ ｹｯｶ ｦ G ﾆ ﾎｿﾞﾝ
710 '
720 FOR I=1 TO 3:FOR J=1 TO 3:FOR K=1 TO 3:FOR M=1 TO 3
730 G(I,J,K,M)=B(I,J,K,M)-T(I,J,K,M)
740 NEXT M,K,J,I
750 '
760 GOSUB *TS :'S=T
770 GOSUB *CONVERT:'S ﾉ ﾅｲﾖｳ ｦ ﾓｼﾞﾚﾂ ﾆ ﾍﾝｶﾝ ｽﾙ input S(3,3,3,3) output AA
780 AB=AA:'ｹｯｶ ｦ AB ﾆ ﾎｿﾞﾝ ｽﾙ
790 AA="":'AA clear
800 '
810 GOSUB *US :'S=U
820 GOSUB *CONVERT
830 AC=AA
840 AA=""
850 '
860 GOSUB *GS :'S=G
870 GOSUB *CONVERT
880 AE=AA
890 '
900 'ｹｯｶ PRINT
910 '
920 PRINT "          *********  "+AD+"   *********":'ﾀｲﾄﾙ print
930 PRINT
940 PRINT "(";AE;")";"δ(αγ)δ(βδ)δ(αβ)"
```

```
950 PRINT
960 PRINT "(";AC;")";"δ(αγ)δ(βδ)δ(α,-β)"
970 PRINT
980 PRINT "(";AB;")";"δ(αδ)δ(βγ)"
990 END
1000 '
1010 *MAIN
1020 'input L(1,*)-L(10,*) output B(3,3,3,3)
1030 '
1040 'for-next ﾉｱｲﾀﾞ ﾉ ｿｳｻｦ ｽﾍﾞﾃﾉ intermidiate spin state ﾆ  ﾂｲﾃ ｵｺﾅｳ
1050 '
1060 FOR S1=-1 TO 1 STEP 2
1070 FOR S2=-1 TO 1 STEP 2
1080 FOR S3=-1 TO 1 STEP 2
1090 FOR S4=-1 TO 1 STEP 2
1100 FOR S5=-1 TO 1 STEP 2
1110 FOR S6=-1 TO 1 STEP 2
1120 '
1130 'V=0
1140 '
1150 FOR I=1 TO 4
1160 V(I,1)=0:V(I,2)=0:V(I,3)=0:V(I,4)=0:V(I,5)=0:V(I,6)=0:V(I,7)=0:V(I,8)=0
1170 NEXT I
1180 '
1190 'internal line ﾆ intermidiate spin ｦ set ｽﾙ
1200 '
1210 L(1,2)=S1:L(2,2)=S2:L(3,2)=S3:L(4,2)=S4:L(5,2)=S5:L(6,2)=S6
1220 '
1230 'external line ﾉ state ｦ vertex ﾆ ｱﾀｴﾙ
1240 '
1250 FOR K=7 TO 10
1260 W5=L(K,4):W6=L(K,3)
1270 IF W5=0 THEN 1310
1280 IF V(W5,1)<>0 THEN 1300
1290 V(W5,1)=L(K,1):V(W5,2)=L(K,2):GOTO 1340
1300 V(W5,3)=L(K,1):V(W5,4)=L(K,2):GOTO 1340
1310 IF V(W6,5)<>0 THEN 1330
1320 V(W6,5)=L(K,1):V(W6,6)=L(K,2):GOTO 1340
1330 V(W6,7)=L(K,1):V(W6,8)=L(K,2):GOTO 1340
1340 NEXT K
1350 '
1360 'internal line ﾉ state ｦ vertex ﾆ ｱﾀｴﾙ
1370 '
1380 FOR I=1 TO 6
1390 W5=L(I,4):W6=L(I,3)
1400 IF V(W5,1)<>0 THEN 1420
1410 V(W5,1)=L(I,1):V(W5,2)=L(I,2):GOTO 1430
1420 V(W5,3)=L(I,1):V(W5,4)=L(I,2)
```

```
1430 IF V(W6,5)<>0 THEN 1450
1440 V(W6,5)=L(I,1):V(W6,6)=L(I,2):GOTO 1460
1450 V(W6,7)=L(I,1):V(W6,8)=L(I,2)
1460 NEXT I
1470 '
1480 'ｽﾍﾞﾃ ﾉ vertex ﾃﾞ spin ｶﾞ ﾎｿﾞﾝ ｼﾃｲﾙｶ ｼﾗﾍﾞﾙ
1490 '
1500 W3=1
1510 FOR J=1 TO 4
1520 W1=V(J,2)+V(J,4):W2=V(J,6)+V(J,8)
1530 IF W1<>W2 THEN W3=W3*0
1540 NEXT J
1550 '
1560 'ﾎｿﾞﾝ ｼﾃｲﾅｹﾚﾊﾞ ﾂｷﾞﾉ spin state ﾆ ｳﾂﾙ (GO next s1,s2,s3,s4,s5,s6)
1570 '
1580 IF W3=0 THEN 2160
1590 '
1600 'ｽﾍﾞﾃ ﾉ vertex ﾆ ｽﾍﾞﾃ ﾉ coupling constant ｦ ﾜﾘｱﾃﾙ
1610 '
1620 '
1630 FOR K=1 TO 3:'vertex 1 K=1(g1∥) K=2(g2) k=3(g1p)
1640 FOR M=1 TO 3:'vertex 2 M=1 ····
1650 FOR N=1 TO 3:'vertex 3
1660 FOR O=1 TO 3:'vertex 4
1670 '
1680 'vertex 1 ﾃﾞ ﾜﾘｱﾃﾗﾚﾃｲﾙ coupling constant ｶﾞ ﾕﾙｻﾚﾙｶ ｼﾗﾍﾞﾙ
1690 '
1700 IF (V(1,2)+V(1,4))=0 THEN 1770:'perpendiculer ｶ ｼﾗﾍﾞﾙ
1710 IF K=3 THEN 2140 ELSE 1840
1720 '
1730 'pararel ﾃﾞ g1perpend ﾅﾗ ｺﾉ ｸﾐｱﾜｾ ﾊ ﾌﾞﾂﾘﾃｷﾆ
1740 'ｱﾘｴﾅｲ ﾉﾃﾞ ﾂｷﾞﾉ coupling constant ﾉ ｸﾐｱﾜｾ ﾆ ﾕｸ (GO next O,N,M,k)
1750 'ｿﾚ ｲｶﾞｲ (paralel and g1∥or g2) ﾅﾗ ﾕﾙｻﾚﾙﾉﾃﾞ ﾂｷﾞﾉ vertex ﾍ ﾕｸ
1760 '
1770 W7=V(1,1)*V(1,2)*V(1,5)*V(1,6)
1780 IF W7<0 AND K=3 THEN 1840:'g1p ok ﾂｷﾞ ﾉ vertex ﾍ ﾕｸ
1790 IF W7>0 AND K=2 THEN 1840:'g2 ok
1800 GOTO 2140:'g1∥ﾓ g1P ﾓ g2 ﾓ ｱﾃﾊﾏﾗﾅｹﾚﾊﾞ ﾂｷﾞﾉ spin state ﾍ ﾕｸ
1810 '
1820 'vertex 2 ﾃﾞ ﾜﾘｱﾃﾗﾚﾃｲﾙ coupling constant ｶﾞ ﾕﾙｻﾚﾙｶ ｼﾗﾍﾞﾙ
1830 '
1840 IF (V(2,2)+V(2,4))=0 THEN 1860
1850 IF M=3 THEN 2140 ELSE 1920
1860 W7=V(2,1)*V(2,2)*V(2,5)*V(2,6)
1870 IF W7<0 AND M=3 THEN 1920
1880 IF W7>0 AND M=2 THEN 1920
1890 GOTO 2140
1900 '
```

```
1910 'vertex 3 ﾃﾞ ･･･
1920 IF (V(3,2)+V(3,4))=0 THEN 1940
1930 IF N=3 THEN 2140 ELSE 2010
1940 W7=V(3,1)*V(3,2)*V(3,5)*V(3,6)
1950 IF W7<0 AND N=3 THEN 2010
1960 IF W7>0 AND N=2 THEN 2010
1970 GOTO 2140
1980 '
1990 'vertex 4 ﾃﾞ ･･･
2000 '
2010 IF (V(4,2)+V(4,4))=0 THEN 2030
2020 IF O=3 THEN 2140 ELSE 2130
2030 W7=V(4,1)*V(4,2)*V(4,5)*V(4,6)
2040 IF W7<0 AND O=3 THEN 2130
2050 IF W7>0 AND O=2 THEN 2130
2060 GOTO 2140
2070 '
2080 'B ﾆ coupling constant ｦ set ｽﾙ
2090 '
2100 'g2(K=2,M=2,N=2,O=2) ﾊ ﾏｲﾅｽ ﾉ ｱﾀｲ(-g2) ｦ ﾓﾂﾉﾃﾞ (-1)^(k+1)･･･ ﾄｽﾙ
2110 'ｺｳｽﾙﾄ g2 ﾃﾞ(-1)^(2+1)=-1 ｶﾞset ｻﾚ g1‖,g1p ﾊ (-1)^(1+1)=(-1)^(3+1)=1 ﾄﾅﾙ
2120 '
2130 B(K,M,N,O)=((-1)^(K+1))*((-1)^(M+1))*((-1)^(N+1))*((-1)^(O+1))+B(K,M,N,O)
2140 NEXT O,N,M,K
2150 '
2160 NEXT S6,S5,S4,S3,S2,S1
2170 RETURN
2180 '
2190 'S ｦ ﾓｼﾞﾚﾂ ﾆ ﾍﾝｶﾝ ｽﾙ (input S  output AA)
2200 '
2210 *CONVERT
2220 '
2230 'S ｦ ｾｲﾘ ｽﾙ
2240 '
2250 WW(1)=3:WW(2)=5:WW(3)=7
2260 FOR I=1 TO 3
2270 FOR J=1 TO 3
2280 FOR N=1 TO 3
2290 FOR O=1 TO 3
2300 IF S(I,J,N,O)=0 THEN 2420
2310 W=WW(I)*WW(J)*WW(N)*WW(O)
2320 FOR K=1 TO 3
2330 FOR L=1 TO 3
2340 FOR M=1 TO 3
2350 FOR P=1 TO 3
2360 IF S(K,L,M,P)=0 THEN 2410
2370 W2=WW(K)*WW(L)*WW(M)*WW(P)
2380 IF I=K AND J=L AND N=M AND O=P THEN 2410
```

```
2390 IF W=W2 THEN 2400 ELSE 2410
2400 S(I,J,N,O)=S(I,J,N,O)+S(K,L,M,P):S(K,L,M,P)=0
2410 NEXT P,M,L,K
2420 NEXT O,N,J,I
2430 '
2440 'S ﾉ ｷﾞｮｳﾚﾂ ﾖｳｿ ｦ ﾓｼﾞﾚﾂ ﾆ ﾍﾝｶﾝ ｽﾙ
2450 '
2460 A(1)="g1‖":A(2)="g2":A(3)="g1P"
2470 A="*"
2480 FOR I=1 TO 3
2490 FOR J=1 TO 3
2500 FOR K=1 TO 3
2510 FOR M=1 TO 3
2520 IF S(I,J,K,M)=0 THEN 2580:'ｷﾞｮｳﾚﾂ ﾖｳｿｶﾞ 0 ﾅﾗ ﾅﾆﾓｼﾅｲ
2530 IF S(I,J,K,M)>0 THEN ASN=" +" ELSE ASN=" -":'ﾌｺﾞｳ ｦ ASN ﾆ ﾀﾞｲﾆｭｳ
2540 IF ABS(S(I,J,K,M))<>1 THEN 2570 :'ｹｲｽｳ ｶﾞ 1 ｶ ｼﾗﾍﾞﾙ
2550 AA=ASN+A(I)+A+A(J)+A+A(K)+A+A(M)+AA:GOTO 2580
2560 '
2570 AA=ASN+STR$(ABS(S(I,J,K,M)))+A+A(I)+A+A(J)+A+A(K)+A+A(M)+AA
2580 NEXT M,K,J,I
2590 RETURN
2600 '
2610 *BT
2620 FOR I=1 TO 3:FOR J=1 TO 3:FOR K=1 TO 3:FOR M=1 TO 3
2630 T(I,J,K,M)=B(I,J,K,M)
2640 NEXT M,K,J,I
2650 RETURN
2660 *BU
2670 FOR I=1 TO 3:FOR J=1 TO 3:FOR K=1 TO 3:FOR M=1 TO 3
2680 U(I,J,K,M)=B(I,J,K,M)
2690 NEXT M,K,J,I
2700 RETURN
2710 *TS
2720 FOR I=1 TO 3:FOR J=1 TO 3:FOR K=1 TO 3:FOR M=1 TO 3
2730 S(I,J,K,M)=T(I,J,K,M)
2740 NEXT M,K,J,I
2750 RETURN
2760 *GS
2770 FOR I=1 TO 3:FOR J=1 TO 3:FOR K=1 TO 3:FOR M=1 TO 3
2780 S(I,J,K,M)=G(I,J,K,M)
2790 NEXT M,K,J,I
2800 RETURN
2810 *US
2820 FOR I=1 TO 3:FOR J=1 TO 3:FOR K=1 TO 3:FOR M=1 TO 3
2830 S(I,J,K,M)=U(I,J,K,M)
2840 NEXT M,K,J,I
2850 RETURN
2860 DATA  5A
```

```
2870 DATA -1,0,1
2880 DATA -1,1,2
2890 DATA -1,2,3
2900 DATA -1,3,4
2910 DATA -1,4,0
2920 DATA  1,0,1
2930 DATA  1,1,2
2940 DATA  1,2,3
2950 DATA  1,3,4
2960 DATA  1,4,0
```